

*Ефимова Е. Д.*  
Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург  
*kapitu@mail.ru*  
*Русакова А. Г.*  
ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет  
им. первого Президента России Б.Н. Ельцина»,  
г. Екатеринбург  
*rusanager@gmail.co*

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ РАВНОВЕСИЯ ФАЗ В БИНАРНЫХ СИСТЕМАХ МЕТОДОМ НЕРАВНОВЕСНОГО ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА**

На сегодняшний день разработаны мощные пакеты, позволяющие рассчитывать фазовые диаграммы (ФД) сложных многокомпонентных систем: FactSage, MTDATA, PANDAT, Thermo-Calc, NUCLEA/GEMINI и др. В основе этих программ лежит идеология CALPHAD [1] (CALculation of PHAse Diagrams) и набор универсальных баз данных (примеры можно найти на сайте [2]). В рамках CALPHAD метода в основном проводится процедура оптимизации параметров сплайн-функций для свободных энергий фаз в результате самосогласованного расчета ряда имеющихся (часто разнородных) термодинамических данных относительно равновесия этих фаз. При этом надежное описание получается для тех частей ФД, для которых заранее имеется значительный объем экспериментальной информации. Будучи реализован в одном из пакетов, процесс вычислений полностью автоматизирован и требует от пользователя только задания состава системы и области расчета ФД. Детали вычислений в большинстве случаев остаются за кадром (некоторые из перечисленных программ даже не выдают информацию об используемой модели и значениях ее параметров). Таким образом, работа по расчету ФД часто сводится к «черному ящику». Тем ни менее если пользователя интересуют фазовый состав сплава или растворимости компонентов в фазах при данном составе и температуре, то CALPHAD метод оказывается крайне удобным. Поэтому возникший около полувека назад CALPHAD подход оказался в настоящее время наиболее востребованным, особенно при решении сложных технологических задач.

При этом остается широкий класс металловедческих задач, когда исследователю необходимо понимать причины изменения относительной

стабильности фаз в терминах компактного набора параметров, желательно обладающих прозрачным физическим смыслом. Для решения подобных задач стандартный CALPHAD подход часто оказывается не удобным. Альтернативный метод моделирования ФД может быть основан на теории фазовых переходов Ландау. Теория базируется на концепции параметра порядка, в общем случае многокомпонентного, который быстро или скачком изменяется в точке фазового перехода. Основной задачей подхода оказывается построение неравновесного термодинамического потенциала (НТП), зависящего как от внешних (фиксируемых) параметров, задающих термодинамическое состояние системы, так и от внутренних (варьируемых) параметров, определяющих значения параметра порядка. Затем осуществляется процедура минимизации НТП по внутренним параметрам, приводящая к системе уравнений на их равновесные значения. Данные уравнения, как правило, имеют несколько решений, соответствующих различным фазам в системе. Подстановка этих решений в НТП дает уже набор обычных равновесных свободных энергий для всех фаз. Дальнейший расчет ФД в принципе осуществляется как в CALPHAD методе. Основным отличием метода НТП является то, что сразу при моделировании системы вводятся величины, характеризующие различие между фазами (параметры порядка). НТП описывает систему целиком, включая все ее возможные равновесные и метастабильные фазы. Эти фазы получаются варьированием НТП по параметрам порядка как стабильные решения уравнений равновесия исследуемой системы. Свободные энергии фаз автоматически получаются из НТП в результате подстановки в него соответствующих стабильных решений. Кроме того, с точки зрения идеологии теории фазовых переходов, моделирование равновесия фаз системы следует начинать именно с построения НТП как характеристики, которая сразу содержит информацию обо всех этих фазах, включая области их равновесного и метастабильного существования.

Метод НТП требует от исследователя больших усилий на всех этапах расчета ФД: от построения исходной модели до анализа полученных результатов. По этой причине развитию этих методов в последние годы уделяется относительно мало внимания. Исключение составляет метод фазовых полей (аналог набора параметров порядка), используемый при моделировании кинетики фазовых превращений на основе НТП. Для построения НТП в принципе могут быть использованы и физически обоснованные модели взаимодействия компонентов в фазах, которые разработаны в рам-

ках самого CALPHAD подхода при условии их обобщения на всю систему. Метод НТП полезен при выявлении причин изменения стабильности фаз под действием внешних условий или общего состояния системы, например при переходе сплава в ультрадисперсное состояние в процессе интенсивной пластической деформации. Такое понимание, очевидно, играет важную роль не только с практической, но прежде всего с фундаментальной точки зрения.

#### **Список источников**

1. H. Lucas, S. G. Fries, and B. Sundman. Computational Thermodynamics. The Calphad Method. Cambridge University Press. 2007.
2. [www.thermocalc.com](http://www.thermocalc.com).